

Reliable nonsymmetric block Lanczos algorithms

Doctoral Thesis**Author(s):**

Loher, Damian

Publication date:

2006

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005143390>

Rights / license:

In Copyright - Non-Commercial Use Permitted

Diss. ETH No. 16337

Reliable Nonsymmetric Block Lanczos Algorithms

A dissertation submitted to the

SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH

for the degree of
Doctor of Mathematics

presented by

DAMIAN LOHER
dipl. phys. ETH
born 25.07.1968

citizen of
St. Gallen and Oberriet SG

accepted on the recommendation of

Prof. M. Gutknecht, examiner
Prof. R. Jeltsch, co-examiner

2006

Abstract

In this thesis we consider a new approach to the iterative solution of linear systems

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B}$$

with a nonhermitian, nonsingular coefficient matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ and multiple right-hand sides stored in $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{N \times s}$ that are all known in advance. We intend to generalize methods based on the unsymmetric Lanczos process, such as QMR and BiCG, to the block case, thereby including look-ahead and deflation (i.e. the elimination of (nearly) linearly dependent right and left Lanczos vectors). We propose to make use of block operations whenever possible, in contrast to the algorithm developed by Aliaga, Boley, Freund and Hernandez [1], where a vectorwise construction of the basis vectors for the block Krylov spaces is used. We point out, however, that with the algorithm from [1], the matrix vector products could still be computed blockwise, but other operations like orthogonalizations of new vectors have to be done vectorwise. In our algorithm, all operations are done blockwise, and this leads to the additional possibility of permuting columns to avoid look-ahead in certain situations. Additionally, a completely blockwise approach offers more potential for program optimization.

From the above it follows that the first step is to develop a suitable block version of the unsymmetric Lanczos process. This is achieved by decoupling the sizes of the right and left clusters (defined by the diagonal blocks of the block diagonal inner product matrix of the left and right Lanczos vectors) from the sizes of the right and left blocks. Consequently, the cluster size is not related to the sizes of the blocks, and we may choose it according to aspects like performance and numerical stability. We will formulate our block Lanczos algorithm in such a way that the look-ahead strategy (which also determines the cluster size) can be varied by changing just a few statements of the algorithm so that different variants can be tried out easily. The result of the first step are two algorithms which are generalizations of the look-ahead Lanczos biorthogonalization method (LABiO) and the look-ahead Lanczos biorthogonalization and biconjugation method (LABiOC) to the block case.

The second step is then to construct iterative solvers on the basis of our block Lanczos process. This will be done for QMR and BiCG in the second part of this work. In the case of QMR, only the variant based on our block version of LABiO will be developed, and for BiCG, we will consider block variants of BiORES and BiOMIN. At the end of this part, numerical experiments are carried out to test the new algorithms.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit betrachten wir einen neuen Weg, um lineare Gleichungssysteme

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B}$$

mit nichthermitescher, regulärer Koeffizientenmatrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ und mehreren rechten Seiten in $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{N \times s}$ iterativ zu lösen, wobei alle rechten Seiten schon im voraus bekannt sein müssen. Wir wollen Methoden, die auf dem unsymmetrischen Lanczos-Prozess aufbauen, wie z. B. QMR und BiCG, auf den Blockfall verallgemeinern und dabei auch Look-ahead und Deflation (also die Elimination von (beinahe) linear abhängigen rechten und linken Lanczos-Vektoren) berücksichtigen. Wir schlagen vor, dass Blockoperationen verwendet werden, wann immer dies möglich ist, im Gegensatz zum Algorithmus von Aliaga, Boley, Freund und Hernandez [1], wo die Basisvektoren für die Block-Krylovräume einzeln erzeugt werden. Zwar könnten beim Algorithmus aus [1] die Matrix-Vektor-Produkte ebenfalls blockweise berechnet werden, aber andere Operationen wie die Orthogonalisierung neuer Vektoren müssen für jeden Vektor einzeln durchgeführt werden. Bei unserem Algorithmus werden alle Operationen blockweise gemacht, und dies führt zur zusätzlichen Möglichkeit, Spalten zu vertauschen, damit in gewissen Situationen Look-ahead vermieden werden kann. Weiter bietet der blockweise Zugang mehr Potential, Programme zu optimieren.

Aus dem Obigen folgt, dass der erste Schritt darin besteht, eine geeignete Blockversion des unsymmetrischen Lanczos-Prozesses zu entwickeln. Dies wird dadurch erreicht, dass die Grösse der

linken und rechten Cluster (die durch die diagonalen Blöcke der blockdiagonalen Skalarproduktmatrix der linken und rechten Lanczos-Vektoren definiert ist) entkoppelt wird von den Grössen der rechten und linken Blöcke. Die Clustergrösse ist daher unabhängig von den Grössen der rechten und linken Blöcke, und wir können sie gemäss anderen Aspekten wie Geschwindigkeit oder numerischer Stabilität wählen. Wir werden unseren Block-Lanczos-Prozess so formulieren, dass die Look-ahead-Strategie (die auch die Grösse der Cluster bestimmt) durch Ändern von wenigen Anweisungen des Algorithmus variiert werden kann, so dass verschiedene Varianten leicht ausprobiert werden können. Das Resultat des ersten Schrittes sind zwei Algorithmen, die die Biorthogonalisationsmethode von Lanczos mit Look-ahead (LABiO) und die Biorthogonalisations- und Bikonjugationsmethode von Lanczos mit Look-ahead (LABiOC) auf den Blockfall verallgemeinern.

Im zweiten Schritt werden dann iterative Löser konstruiert, die auf unserem Block-Lanczos-Prozess aufbauen. Dies wird für QMR und BiCG im zweiten Teil der Arbeit durchgeführt. Im Fall von QMR wird nur eine Version entwickelt, die auf unserer Blockversion von LABiO aufbaut, und bei BiCG werden wir Blockvarianten von BiORES und BiOMIN betrachten. Am Schluss dieses Teils werden numerische Experimente durchgeführt, um die neuen Algorithmen zu testen.